

2011 年度 修士論文要旨

ベイジアンネットによる 化学物質の反復投与毒性の評価

関西学院大学大学院理工学研究科
情報科学専攻 岡田研究室 廣島 亮

化学物質の有害性情報の収集・評価において、反復投与毒性は動物試験により毒性データを得ている。動物試験によらずに、毒性の判定を行える反復投与毒性予測モデルの構築には、質の高い反復投与毒性試験報告書や毒性作用機序・代謝情報等を統合的に集積した知識情報データベースを必要とするが、NITEで作成した反復投与毒性試験報告書のデータベースは、これを可能にすると考えられる。

岡田研究室では、NITE のデータから、化学物質の毒性を示す特徴的な部分構造(BAS : Basic Active Structure)を対象にマイニングを行い、知識ベースであるBASiCで公開している。また、NITEでもカテゴリーアプローチによる毒性予測を行っている。これらを基に構築した、ベイジアンネットによる毒性予測モデルは、既存の毒性評価システムよりも優れた予測を可能にすると考えられる。

そこで、BAS データによる毒性予測ネットワークと、カテゴリーアプローチによる毒性予測ネットワークを作成し、さらに別途作成されているToxBayシステムのネットワークを含めて、これらの毒性予測精度を比較検証した。

その結果、特定の毒性項目には高い精度で予測可能なネットワークと、多種の化学物質にも対応し、毒性予測を可能にするネットワークも確認できた。

これにより、化学物質のリスク評価・管理技法の発展に寄与することができた。